Hratree-Fock方程式の新解法とその応用(原子核とマイクロクラスターの類似性と異質性,研究会報告)

岩沢, 和男; 坂田, 文彦; 橋本, 幸男

Hratree-Fock 方程式の新解法とその応用

名古屋商科大　岩沢和男
東大核研　坂田文彦
筑波大物理　橋本幸男

1 初めに

最近の原子核物理学の発展により、変形度の異なる安定な平均場が、唯一つの原子核においても数多く存在する事が明らかになってきた (異形状共存現象)。原子核のような量子力学的多体系における非線形集団振動、核融合・核分裂、深部非弾性散乱等を記述する大振幅集団運動論（非線形・非平衡系の動力学理論）を展開するにあたっては、複数の安定な平均場のまわりのポテンシャル構造とその相互の関係を適切に評価しておく事が必要である。

通常、constraint Hartree-Fock (CHF) 方程式を解く際は、集団運動を特徴づけると思われる拘束演算子を選択し、与えられた拘束条件を満たす最も Energy の低い解を求める (断熱近似)。拘束条件を変化させて得られる断熱解の Energy は断熱ポテンシャルと呼ばれ、系の拘束演算子に関る運動は、まず、この断熱ポテンシャルに基づいて議論できると考えられている。

しかしこの断熱近似の下では、ある極小点まわりの断熱ポテンシャルが浅すぎたり、そもそも極小点が存在しない等、必ずしも安定な平均場が得られない事が知られている [1]。それ故、様々な非断熱的（「透過的」と呼ばれる）処方が開発され成果をあげてきた。だが、これら現象論的な処方を用いて断熱近似の問題点を回避する事はできても、各透過的ポテンシャルの相互関係までは議論できない。更に、異なる配位、あるいは異なる内部状態で特徴づけられると考えられる様々な回転バンドがいつ発生し何故消滅するのかは、断熱近似・透過的処方のいずれを用いても記述する事は難しい。

安定な平衡点回りの線形近似を越えて量子力学的多体系の示す複雑な運動を理解して行く為には、断熱近似・透過的処方のいずれをも越えた方法論が必要になる。そこで、2 章で断熱近似の持つ位相空間中での物理的意味を明確にし、その結果に基づいて 3 章で数多くの平均場を見出す新たな方法を示す。その方法の応用と大振幅集団運動論への展望について 4 章で議論する。但し、簡単の為に原子核系を記述する際に重要な対相関は無視する。

2 拘束条件付き Hartree-Fock 方程式の解空間

2.1 time dependent Hartree-Fock 空間

以下の議論を明確にする為、時間依存 Hartree-Fock(TDHF) 空間を定義する独立変数を用意する。任意の時間依存 Slater 行列式 $|\phi(t)\rangle$ は、ある HF 状態 $|\phi_0\rangle$ からの Unitary 変

換で表す事ができる。

$$|\phi(t)\rangle = e^{\hat{F}(t)}|\phi_0\rangle, \quad \hat{F}(t) = \sum_{\mu i}\{f_{\mu i}(t)c_\mu^\dagger c_i - f_{\mu i}^*(t)c_i^\dagger c_\mu\}. \tag{1}$$

但し、$\mu(i)$ は、HF 状態 $|\phi_0\rangle$ に対する粒子 (空孔) 状態を表すものとする。ここで、次の正準変数を定義する。

$$C_{\mu i} = \left(f\frac{\sin\sqrt{f^\dagger f}}{\sqrt{f^\dagger f}}\right)_{\mu i}, \quad C_{\mu i}^* = \left(\frac{\sin\sqrt{f^\dagger f}}{\sqrt{f^\dagger f}}f^\dagger\right)_{i\mu}. \tag{2}$$

この変数は Unitary 変換 $e^{\hat{F}(t)}$ の表現行列を完全に指定する事ができ、従って、状態 $|\phi(t)\rangle$ を $|C(t), C^*(t)\rangle$ と表してもよい。この正準変数の時間発展は、期待値で表される Hamiltonian $\mathcal{H} = \langle\phi|H|\phi\rangle$ を用いて、次の正準方程式で表せる。

$$i\hbar\dot{C}_{\mu i} = \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial C_{\mu i}^*}, \quad i\hbar\dot{C}_{\mu i}^* = -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial C_{\mu i}}. \tag{3}$$

CHF 方程式の様に静的な問題を議論する際には、

$$x_{\mu i} = (C_{\mu i} + C_{\mu i}^*)/\sqrt{2}, \quad p_{\mu i} = i(C_{\mu i} - C_{\mu i}^*)/\sqrt{2}, \tag{4}$$

として、$\{x_{\mu i}\}$ が張る空間（我々はこれを TDHF 座標空間と呼ぶ）を用いるのが便利である。

2.2 Constraint Hartree-Fock 方程式

拘束演算子を Q とすると CHF 方程式は、

$$\begin{aligned} \delta\langle\phi|H - \lambda Q|\phi\rangle &= 0, & (5) \\ \langle\phi|Q|\phi\rangle &= q. & (6) \end{aligned}$$

とかける。方程式 (5) を先に述べた TDHF 座標変数を用いて表すと、

$$\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial x_{\mu i}} = \lambda\frac{\partial Q}{\partial x_{\mu i}} \tag{7}$$

であり、また (6) 式は $Q(x_{\mu i}) = q$ となり、$\{x\}$ 空間から $\{q\}$ 空間への射像を表す。

我々は Ref.[2] において、3 準位モデルを定義した ($i = 0, \mu = 1, 2$)。この場合、TDHF 座標空間は $\{x_{10}, x_{20}\}$ の 2 次元になる。また、(7) 式は、Lagrange 乗数を消去して、

$$\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial x_{10}}\frac{\partial Q}{\partial x_{20}} - \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial x_{20}}\frac{\partial Q}{\partial x_{10}} = 0. \tag{8}$$

と、唯一つの方程式になる。この方程式を数値的に解く事で、我々は以下の結論を得た。即ち、CHF 方程式 (5) は、TDHF 座標空間でそれぞれが微分可能な複数の解曲線を与え、

(我々はこれを CHF-line と呼ぶ) 各 HF 状態は、必ずいずれかの CHF-line 上にある。(6) 式が多対一の射像である事から、$\{q\}$ 空間で表した CHF-line が交差する事が起きる。従って、常に最も Energy 的に低い解が $\{x\}$ 空間で一本の CHF-line である保証はない。断熱近似の要請は、CHF-line の連続性を放棄して $\{q\}$ 空間における包絡線を求める事を意味する。その為、断熱ポテンシャルでは TDHF 空間におけるポテンシャルの構造を必ずしも議論できない。

3 Hartree-Fock 方程式の新解法

元々の TDHF 空間の中では Hamiltonian も拘束演算子も正準変数に対して微分可能である事から、CHF 方程式の解 (CHF-line) もこの空間で微分可能である。また、$\{q\}$ 空間に射影された CHF-line はそれぞれ連続である。従って、断熱近似を用いずに CHF 方程式を解くに当たっては、波動関数の連続性

$$\lim_{\delta q \to 0} \langle \phi(q) | \phi(q + \delta q) \rangle = 1,$$

を原理的に保証する解法が必要になる。波動関数の重なり $\langle \phi | \phi' \rangle \simeq 1$ は先の正準変数を用いると $\sum x_{\mu i}^2 \simeq 0$ となり、TDHF 空間での距離が近い事に対応する。

それ故我々は、ある状態に最も近い構造を持ち HF 条件 (若しくは CHF 条件) を満たす波動関数を自己無撞着に見出す為に、以下の方法を提唱した [3]。まず、1 つの Slater 行列式でかかれている状態 (必ずしも HF 条件を満たさない) があるとし、以下ではこれを参照状態と呼ぶことにする。参照状態を初期状態として対角化計算を行う。断熱近似の下では、一粒子 Energy の低い順に占有状態が決定されるが、これが唯一の方法ではない。我々は、参照状態に最も重なりの大きい状態を求める為に、一粒子 Hamiltonian の対角化の各過程で、常に次の Maximum Overlap Criteria (MOC),

$$\langle \psi_i^{\mathrm{RS}} | \psi_j \rangle \simeq \delta_{ij}, \tag{9}$$

を満たすように、新たな占有状態を選ぶ。ここで、$|\psi_i^{\mathrm{RS}}\rangle, |\psi_j\rangle$ は、参照状態と収束過程の波動関数の一粒子状態を、それぞれ表すものとする。この単純な関係式は、二組の一粒子状態間に一対一対応を定義する。従って、常に MOC を満たすようにして得られる収束解は、参照状態に最も近い構造を持つ HF 状態と考えられる。我々はこの方法を状態参照法 (Reference State method) と呼んでいる。この方法は新たな占有状態を決定する際に参照状態を用いる以外は、通常の対角化計算と同じであり、従って、program の修正は容易である。また、拘束条件がある場合にも、もちろん使える。この方法を現実系へ適用した場合の有効性は、Ref. [3] で確認してある。

4 状態参照法の応用

我々の方法の最大の特徴は参照状態が任意に選べる点にあり、従って、様々な応用が考えられる。

まず、多粒子多空孔状態を参照状態とすれば、それに最も近い構造を持つ励起 HF 状態が得られる [3]。各 HF 状態は、また、任意の演算子に対する CHF 状態でもある。そこで一般に、ある拘束条件の下での CHF 状態が求まったとしよう。今求められた状態を新たな参照状態とし、わずかに変化させた拘束条件を用いれば次の CHF 状態が得られる。この手順を繰り返せば、実質的に連続な CHF line を求めて行ける [3]。従って、様々な拘束演算子に対する CHF-line を描き、 line 上での正準変数の変化を追跡する事で、各 (励起) HF 状態近傍のポテンシャル構造が調べられる。但し、 CHF-line は大次元 TDHF 空間におけるポテンシャルの射影にすぎず、系の時間発展そのものを支配するものではない点に注意する。

系の時間変化は TDHF Hamiltonian (一粒子 Hamiltonian) により記述される。Slater 行列式の時間変化を追跡して得られる状態群は TDHF 軌道と呼ばれる。我々の場合、先に求めた CHF line 上の各点を TDHF 軌道の始点に選ぶ事ができる。ある軌道上の任意の状態 (の実部) を参照状態として状態参照法を用いると[1]、一般に、複数の HF 状態が得られる [4]。これは、求められた状態が参照状態に最も近い構造を持つ安定な状態である事から、得られた状態は軌道に影響を与えていたポテンシャルの極値 (停留点) と解釈されよう。従って、CHF-line 上の各点から軌道を求める事で、TDHF 軌道群とポテンシャルの関係を系統的に調べる事が可能になろう。

我々が大振幅集団運動として問題としたいのは、集団的閉軌道、あるいは秩序のある運動である。その際、集団的運動が一粒子運動の変化と如何に結び付いているのかを明らかにする事が、原子核構造論、大振幅集団運動論の基本的な課題である。我々の方法はこの二種類の運動の非線形な関係をとらえる基礎を与える事になる。然るに、非線形系の運動がポテンシャル構造だけでは理解できない事はよく知られている。それ故、実際に量子力学的多体系にどの様な運動状態が存在しうるのか、その際のポテンシャルの影響がいかなるものであるかを知る事は、集団運動の発生・成長・消滅を記述する方法論を確立する為の第一歩と位置付けられる。

参考文献

[1] W. Nazarewicz, Nucl. Phys.**A557** (1993) 489c.

[2] K. Iwasawa, F. Sakata, W. Nazarewitcz, T. Marumori and J. Terasaki, Phys. Lett. **B339** (1994) 1.

[3] K. Iwasawa, F. Sakata, Y. Hashimoto and J. Terasaki, Prog. Theor.Phys. **92** (1994) 1119

[4] Y. Hashimoto, K. Iwasawa, F. Sakata, A. Narui and Y. Kikuyama, in preparation.

[1]このとき拘束条件は不要である。